



TITLE:

一次元準結晶のエネルギースペクトル(クエイサイクリスタルの構造と物性,科研費研究会報告)

AUTHOR(S):

藤田, 光孝; 町田, 一成

CITATION:

藤田, 光孝 ...[et al]. 一次元準結晶のエネルギースペクトル(クエイサイクリスタルの構造と物性,科研費研究会報告). 物性研究 1987, 48(2): A41-A43

ISSUE DATE:

1987-05-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/92503>

RIGHT:

「準結晶」の一次元版の代表例として知られる Fibonacci 格子において電子状態は、その構造が周期的な結晶と乱れのあるアモルファスの中間的な準周期構造を持つことを反映して、Block 状態でもなく局在もしない臨界状態 (critical state) をとると言われている。実験的にも分子線エピタキシー法等により、GaAs-AlAs¹⁾, Mo-V²⁾ Fibonacci 超格子が既に作成されており、電子状態の解明が期待される。Fibonacci 格子は二種類の原子または原子間隔が Fibonacci 配列に並べられたものである。その配列は二種の要素を A と B とすると、置き換え則 $A \rightarrow AB, B \rightarrow A$ で繰り返し行うことにより、作られる。その操作を A から始める時、n 世代目のサイト数を f_n とするとその数は $f_n = f_{n-1} + f_{n-2}$ ($f_0 = f_1 = 1$) で与えられる所謂 Fibonacci 数となる。またこの Fibonacci 配列の n 番目の世代の配列を S_n とすると、 $S_n = \{S_{n-1} : S_{n-2}\}$ 即ち S_n は S_{n-1} の後ろに S_{n-2} をつけることにより作ることが出来るとも言える。従って例えば S_R という配列を Fibonacci 配列の中に見れば、 $S_{R+2} = \{S_R : S_{R-1} : S_R\}$ より S_{R-1} において必ず同じ S_R を見つけることが出来ることとなる。これは準結晶の二次元版の代表例である Penrose 格子の Conway の定理に対応するもので、準結晶の自己相似的な構造を反映したものであり、準結晶構造においては全ての特徴的な長さであることを示している。

我々はこの Fibonacci 格子上の電子状態を tight binding モデル： $t_{n+1}C_{n+1} + t_n C_{n-1} + v_n C_n = \epsilon C_n$ において、サイトポテンシャル $\{v_i\}$ を $v_A (=v)$ と $v_B (= -v)$ の2つの値が Fibonacci 配列に並び $t_i = 1$ (定数) とした Fibonacci On-site Model (FOM) と、交換積分 t_i について t_n と t_{n-1} の2つの値を Fibonacci 配列に並び $v_i = 0$ とした Fibonacci Transfer Model (FTM) を、主にそのスペクトルの性質について数値的に調べた。計算は上の置き換え則に従って出来る。

Fibonacci 配列について各世代毎、周期的境界条件の下数値的に直接計算し、その世代依存性を調べた。二つのモデルについて以下に述べる性質は共通して見られ本質的な違いはなかった。図1はFTMで $t (=t_A/t_B) = 0.6$ とした時のスペクトルの世代依存性である。図から明らかな様にある世代以降は主なギャップ構造は変わらずそのギャップ端は固定されている。世代が進んでスペクトルの数が増ると増加分は既に決まっているギャップの

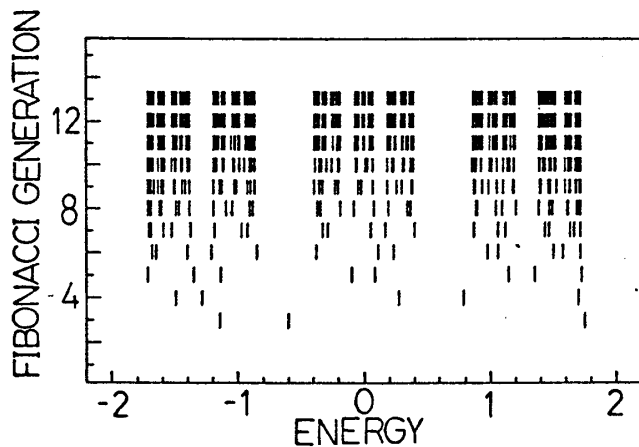
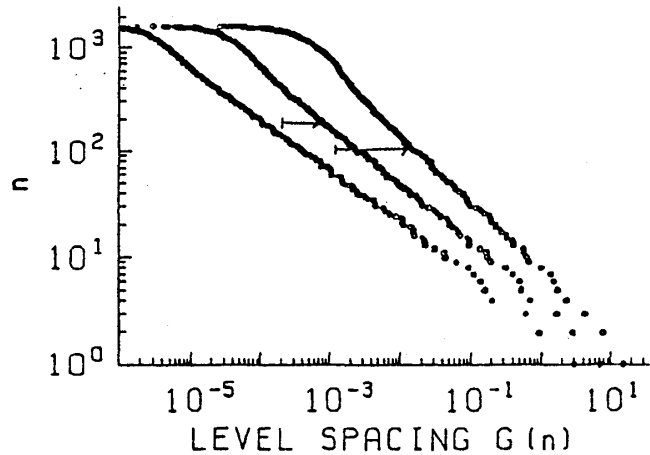
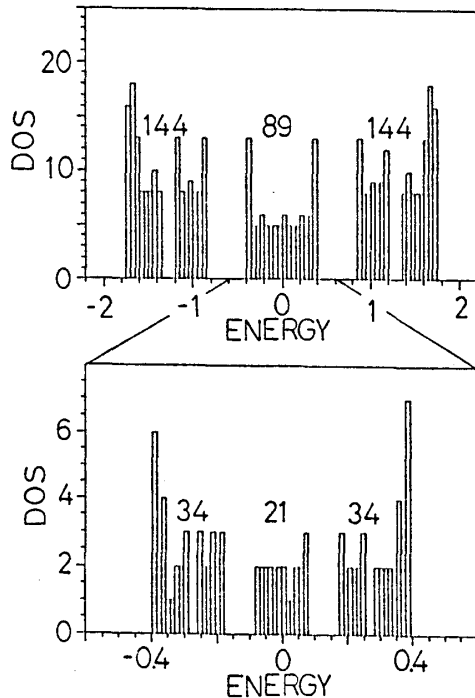


図1 FTMにおけるスペクトルの世代依存性。

($t (=t_A/t_B) = 0.6$)



上: 図3 FOMにおけるレベル間隔 $G(n)$
 左から $\nu=1.8, 1.4, 1.0$ ($N=1597$)

左: 図2 FTM ($N=377, \alpha=0.6$) における
 スペクトル分岐則

内には入らずバンドの内に詰り、同時に小さなギャップを新たに決定する。またスペクトルの集りについてその数はそれぞれ Fibonacci 数であり、それらは図2に示している様に、 $f_n \rightarrow f_{n-3} + f_{n-2} + f_{n-3}$ で表わされるスペクトル分岐則³⁾に従って分れる。図3にはFOMの n 番目に大きいレベル間隔 $G(n)$ を $N = F_{16} (=1597)$ のとき $\nu=1.0, 1.4, 1.8$ について示した。これは極く小さいレベル間隔を除いてギャップを大きい順に並べたものと考えることが出来る。この図から明らかな様に $G(n)$ は逆べき則 (Inverse Power Law (IPL))⁴⁾ 即ち $G(n) \propto n^{-\alpha}$ で表わされることばかりかる。これらの性質は Fibonacci 配列の時だけでなく他の置き換え則によって作られる一次元準結晶モデルについても同様に見られる⁵⁾。レベル間隔の逆べき則については二宮による直観的な説明がある。

準結晶の発見以前からこれらと密接な関係を持つ不整合結晶上の電子状態について多くの研究がなされてきた。一次元不整合ポテンシャル中の電子状態の研究としては、特に Harper モデル: $C_{n+1} + C_{n-1} + \lambda \cos(2\pi\theta n + \phi)C_n = \epsilon C_n$ (θ : 無理数, ϕ : 位相) や $\lambda=2$ の Self-dual 点を境に金属-非金属転移を起こすことと Aubry と Andre⁷⁾ によ、て示されて以来注目を集めている。この転移点上における電子状態は Fibonacci モデルの場合と同様に広がりも局在もしない臨界状態をとりその時のスペクトルは特異連続⁷⁾ と言われている。我々はこのモデルについて $\theta = f_{n-1}/f_n$ と有理数で近似して系のサイズを f_n とし、周期的境界条件の下数値的に対角化し準結晶の場合と同様レベル間隔の観点⁴⁾ から眺めてみた。図4に示したのがそれぞれ、Block 状態、臨界状態、局在状態に対応する $\lambda=1, 2, 3$ の場合についてのレベル間隔 $G(n)$ である。 $\lambda=1$ のとき、即ち全て Block 状態をとる時は $G(n)$ は大きく3つの部分に分かれる。大きいレベル間隔については一直線上に並んでいることからわかる様に逆べき則に従っている。 $G(n) \approx O(10^{-3})$ については図

中に細線で示した様に cosine 関数で表わせる。
またほとんどのレベルが対には、ていることを
反映して $O(10^{-6})$ あたりに、ほとんどゼロに近い
レベル間隔の集りがある。後者二つは周期系
の周期的境界条件の下での結果と酷似している。
 $\lambda=3$ 即ち局在状態の場合には主なギャップの逆ハミ
則を除いて図の細線に示した様に指数関数曲線
にのる。従ってレベル分布は Poisson 分布であ
ることやわかる。 $O(10^{-3})$ にあるくぼみは系の
サイズを大きくすると消える傾向にある。状態
が臨界状態をとる Self-dual 点 $\lambda=2$ では図 4(b)
からわかる様にレベル間隔は Fibonacci モデル
と同様逆ハミ則に従う。この時の指数 α は 2 で
あり他の無理数に対応する θ についても同じ値
が得られることから何か普遍的な値であると思
えらる。この Harper モデルにおいても逆ハ
ミ則が存在する範囲での連分数展開に則した
スペクトル分岐則を見ること出来る。

上の二つのモデルは外から与えたポテンシ
ヤルについての一体問題であった。他にもフォ
ンと電子の結合を考慮した Fröhlich モデル、
SSH モデルについても、その結合定数を大きく
すると局在-非局在転移が起ることや示されて
いる。⁸⁾ またこれに対応してスペクトルは自己相
似的な美しい様相を示す。⁹⁾ これらのモデルにお
いても臨界状態の存在が期待される。これについては現在計算中である。

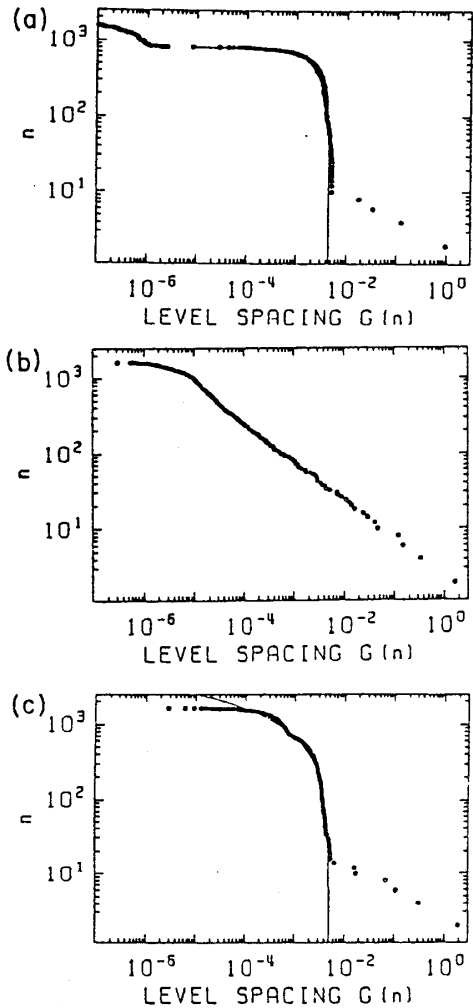


図4 Harper モデル (a) $\lambda=1$ (b) $\lambda=2$
(c) $\lambda=3$ におけるレベル間隔 $G(n)$

- 1) R. Merlin et al : Phys. Rev. Lett 55 (1985) 1768.
 - 2) M.G. Karkut et al : Phys. Rev. B34 (1986) 4390.
 - 3) M. Fujita and K. Machida : Solid State Commun. 59 (1986) 61.
 - 4) K. Machida and M. Fujita : Phys. Rev. B34 (1986) 7367.
 - 5) M. Fujita and K. Machida : J. Phys. Soc. Jpn 56 (1987) No.4 (in press)
 - 6) T. Ninomiya : J. Phys. Soc. Jpn 55 (1986) 3709. 二宮 (本研究会報告)
 - 7) S. Aubry and C. André : Proc Israel Physical Society ed. C.G Kuper 3 (Adam Hilger, Bristol, 1979) 133.
 - 8) P.Y. Le Daéron and S. Aubry : J. Phys C16 (1983) 4827.
 - 9) K. Machida and M. Nakano : Phys. Rev. B34 (1986) 5073.
- 町田一成, 藤田光彦 : 固体物理 21 (1986) 315.